

Posudek doktorské dizertační práce
Quantum computing approach to non-relativistic and relativistic molecular
energy calculations
RNDr. Libora Veise

Posuzovaná práce je napsána jako přehledný výklad na celkem 86 stranách. Dizertační práce je založena na třech publikacích v J. Chem. Phys., Phys. Rev. A a Advances in Chemical Physics. Otisky těchto prací nejsou přiloženy. Ve všech třech případech je prvním autorem uvedených prací RNDr. Veis. Práce je napsána dobrou angličtinou.

Ve stručném úvodu je popsána motivace a přístup k řešení problému.

V kap. 1 je uveden přehled základů kvantových výpočtů počínaje zavedením qubitů a konče přehledem možných fyzikálních realizací kvantových počítačů.

Kapitola 2 je věnována stěžejním výsledkům z oblasti kvantových algoritmů jako je kvantová Fourierova transformace a algoritmy PEA (phase estimation algorithm).

V kap. 3 jsou popsány ideje kvantové verze metody úplné konfigurační interakce (qFCI).

V kap. 4 je navržená metoda qFCI aplikována na molekulu methylen. Výsledky dobře ilustrují úspěšnost navržených metod.

Kapitola 5 je věnována zobecnění metody qFCI na relativistický čtyřkomponentový případ a představuje významný přínos k této problematice. Numerické výpočty byly provedeny na molekule SbH. Navrženy jsou také experimenty ve kterých by bylo možné uvedené kvantové výpočty realizovat.

Žádné větší nedostatky jsem v práci nenašel. Doktorská práce má velmi dobrou úroveň, výklad je srozumitelný a přehledný, grafická úroveň je rovněž velmi dobrá. Publikace, na kterých je disertace založena, zcela nepochybně přinášejí nové zajímavé vědecké poznatky v daném oboru.

Celkově se domnívám, že RNDr. Libor Veis touto prací bez nejmenších výhrad prokázal schopnost samostatné tvořivé vědecké práce na požadované úrovni. Navrhuji proto, aby tato práce byla uznána jako podklad pro udělení vědecké hodnosti Ph.D.

V Praze dne 20.11.2012



Prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc.
Matematicko-fyzikální fakulta UK